

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Studijní program: M2612 - Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 3901T025 - Přírodovědné inženýrství

Modelování transportu látky v puklinovém prostředí s imobilní zónou

Modelling of solute transport in fractured media with immobile zone

Diplomová práce

Autor: **Jiří Havlíček**
Vedoucí práce: Ing. Milan Hokr, Ph.D.
Konzultant: Ing. Otto Severýn, Ph.D.

Liberec 2006

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval svému vedoucímu ing. Milanu Hokrovi za odborné vedení po celou dobu naší spolupráce, podnětné připomínky a všechen věnovaný čas.

Prohlášení

Byl(a) jsem seznámen(a) s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé diplomové práce a prohlašuji, že **s o u h l a s í m** s případným užitím mé diplomové práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědom(a) toho, že užít své diplomové práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše).

Diplomovou práci jsem vypracoval(a) samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum

Podpis

Anotace

Předkládaná diplomové práce se zabývá modelováním transportu rozpuštěných látek puklinovým prostředím s imobilní zónou.

Úkolem bylo nalézt vhodný způsob zahrnutí jevu dvojí porozity do výpočtu transportu a implementovat jej do stávajícího kódu pro výpočet proudění na struktuře 1D, 2D a 3D prvků. Dále porovnat na vhodných testovacích úlohách možnost reprezentace rozpukané horninové matrice přímo jako 3D prvek a jako imobilní zóna asociovaná s 2D prvky.

Do stávajícího programu byl využitím metody rozkladu operátoru začleněn výpočet dvojí porozity. Byla zvolena vhodná zkušební úloha a výpočet byl následně otestován. Dále byly na zkušební úloze porovnány oba přístupy k modelování proudění a transportu puklinovým prostředím.

Oba přístupy se ukázaly jako vzájemně nahraditelné při splnění několika podmínek. Ve vhodném případě je možné oba přístupy kombinovat v rámci jednoho transportního modelu.

Abstract

The diploma thesis deals with modelling of solute transport in fractured media with immobile zone.

The deal was to find out the appropriate manner to include the dual porosity effect into the transport solution and implement it to the existing computer program solving fluid flow on the 1D, 2D and 3D element structure. Then on a suitable test problems compare the possibility of representation fractured rock matrix just as a 3D element and as an immobile zone associated with 2D elements.

The dual porosity calculation was integrated into the existing computer program using operator splitting method. The computation was verified on an appropriate test problem. Then the both methods of modelling flow and transport in fractured media were compared on a test problem.

Both methods proved to be one another replaceable if some conditions are satisfied. In a right case the both methods may be combined within one transport model.

Obsah

1 Úvod do problému	8
2 Fyzikální popis	10
2.1 Puklinové prostředí	10
2.2 Principy reprezentace	11
2.2.1 Porézní prostředí	12
2.2.2 Dvojitá porozita	12
2.2.3 Diskrétní puklinová síť	13
2.2.4 Kombinované přístupy	13
2.3 Porovnávání přístupů	14
2.3.1 Aproximace 1D, 2D a 3D prvky	14
2.3.2 Aproximace s využitím dvojí porozity	14
2.4 Proudění a transport	15
3 Popis numerických metod	17
3.1 Řešení úlohy proudění	17
3.2 Řešení úlohy transportu	17
3.2.1 Metoda rozkladu operátoru	17
4 Program	19
4.1 Struktura vstupů programu	19
4.1.1 Řídicí soubor .ini	19
4.1.2 Datové soubory úlohy	22
4.2 Výpočetní část	22
4.3 Výstupy programu	23
4.3.1 Výstupy do Gmsh	23
4.3.2 Výstupy řezu oblastí	25
5 Testovací úlohy	27
5.1 Základní parametry úlohy	27
5.2 Úloha s okolím	29
5.3 Úloha s imobilní zónou	30
6 Výsledky modelů	31
7 Závěr	42

1 Úvod do problému

Puklinové prostředí je obecně prostorově značně složitá horninová struktura, která spolu s porézním prostředím tvoří běžně se vyskytující podzemní struktury (viz obr. 1). Matematickými modely se snažíme podzemní prostředí popsat tak, abychom mohli studovat děje v něm probíhající.

Modely transportu látek v puklinovém prostředí se v praxi používají při sanačních pracích v oblastech, kde je podzemí zamořeno rozpuštěným kontaminantem. Zde se modelují optimální zásahy z povrchu, aby došlo k efektivnímu odstranění kontaminace. Další použití je při stavbě úložišť nebezpečných látek. Ta se umísťují do kompaktní horniny, která ale vždy obsahuje pukliny. Modely pak reprezentují například havarijní stavy.



Obrázek 1: Puklinová struktura na vzorku horniny. Struktura puklin je znázorněna obarveným roztokem. Patrné jsou průtočné a slepé pukliny.

Z důvodu omezených výpočetních kapacit dnešních počítačů je nutné rozsáhlé úlohy co možná nejvíce zjednodušit, aby bylo možné je vůbec řešit. Ne však na úkor velké změny přesnosti.

Reálné puklinové prostředí můžeme nahradit různými typy zjednodušujících modelů (viz [9]). Jsou to:

1. Porézní prostředí s vlastnostmi odpovídajícími puklinovému

2. Model s dvěma typy porézního prostředí - dvojí porozitou
3. Diskrétní puklinová síť
4. Kombinace předchozích typů

Podrobněji popíšeme dva přístupy.

1. Popis pomocí 1D, 2D a 3D konečných prvků. Jde vlastně o kombinaci bodů 1 a 3 z předchozího výčtu, tedy porézního prostředí s vlastnostmi odpovídajícími puklinovému a diskrétní puklinové síti. Tu využijeme k popisu hlavních puklin. Jejich těsné okolí, které je vlastně rovněž tvořeno puklinami, ale výrazně menších rozměrů, reprezentujeme jako porézní prostředí s parametry zprůměrovanými přes vhodný reprezentativní elementární objem (REV).
2. Reprezentace pomocí modelu s dvojí porozitou. V každém místě saturované struktury uvažujeme dvě oblasti, mobilní a imobilní. V mobilní zóně dochází k fyzikálním dějům, jako je např. konvekce, zatímco v imobilní zóně dochází ke změnám jen vlivem interakce se zónou mobilní. Hlavní pukliny bereme jako mobilní zónu a drobné pukliny navazující na ty dominantní bereme jako zónu imobilní.

Úkolem práce je připojení výpočtu dvojí porozity do původního programu, který počítá proudění a konvektivní složku transportu na struktuře 1D, 2D a 3D prvků. Hlavním cílem je pak porovnání dvou zmíněných reprezentací puklinového prostředí a zhodnocení možnosti využití obou přístupů společně na jedné úloze. Testy jsou prováděny na jednoduché modelové úloze ve 2D. Výsledky ukazují, že oba přístupy jsou vzájemně nahraditelné za dodržení jistých omezení. Ta se týkají rozsahu proměnných parametrů materiálu, geometrie úlohy a s ní souvisejících parametrů. Významnější odchylky ve výsledcích obou přístupů se objevují až na okrajích intervalu parametrů, využitelných na úloze v reálné hornině. V praxi tedy mohou být oba typy popisu v modelu kombinovány.

2 Fyzikální popis

2.1 Puklinové prostředí

Puklinové prostředí je horninová struktura tvořená základní horninovou matricí, rozpukanou v obecných směrech puklinami obecných rozměrů viz obr. 2.



Obrázek 2: *Příklad horniny s patrnou dominantní puklinou a z ní vybíhajícími strukturami.*

Horninová matrice je porézní struktura s velmi malým podílem objemu pórů vůči celému objemu referenční oblasti. Je tedy schopna do své struktury pojmout určité malé množství tekutiny, se kterou se následně může šířit látka v tekutině rozpuštěná. Její šíření je však pomalé.

Struktura a velikost puklin závisí na typu horniny. V hornině s vrstevnatou strukturou vzniknou pukliny převážně rovnoběžné, zatímco ve struktuře bez preferovaných směrů bude rozmístění puklin spíše nahodilé.

Z hlediska proudění a transportu lze pukliny dělit podle převažující vodivosti či akumulace. Velké pukliny z převážné části zajišťují vedení kapaliny prostředím a málo se podílejí na její akumulaci, zatímco u puklin s řádově menšími rozměry nebo slepých je tomu právě naopak. Příklad takových puklin je vidět na obrázcích 2 a 3. Můžeme zde vysledovat významné pukliny procházející přes celou



Obrázek 3: *Hornina se dvěma významnými puklinami a systémem na ně navazujících drobných puklin.*

zobrazenou oblast. Na tyto dominantní pukliny navazují systémy puklin drobných, nedominantních. Vlivem difuzně-disperzních dějů se transportovaná látka dostane i do těchto drobných struktur, ze kterých se pak při poklesu koncentrace v dominantních strukturách vrací zpět a je konvektivně unášena dál. Svůj význam na výsledný transport látky prostředím tedy mají obě skupiny puklin a při popisu prostředí nelze žádnou z nich zanedbat. Problematika je diskutována v [1].

2.2 Principy reprezentace horninového prostředí

Přístupy k modelování dějů v horninovém prostředí nejsou ustáleny. Jak už bylo zmíněno v úvodu, rozlišujeme několik směrů, užívaných při modelování. V následujícím textu budou stručně vysvětleny.

2.2.1 Porézní prostředí

Porézní prostředí je typická reprezentace hornin sedimentálního původu, ale používá se i pro nahrazení rozpukaných hornin ([2], [3], [4]).

Popisuje se jako struktura, jež je tvořena zrny materiálu, která však nezplňují 100% objemu. Mezi zrny jsou volné póry, které uvažujeme jako navzájem propojené, a které mohou být zaplněny kapalinou. Při detailním pohledu jde o strukturu nehomogenní. Takto přesný popis však pro účely modelování není zapotřebí. Proto popis homogenizujeme a dále uvažujeme jako spojitě prostředí.

Na modelované oblasti definujeme reprezentativní elementární objem (REV), který vypovídá o vlastnostech horniny v daném místě za současného zjednodušení jejího popisu.

Velikost REV volíme vhodným způsobem tak, aby jeho objem byl výrazně menší než objem celé modelované oblasti. Zároveň ale musí být dostatečně velký na to, aby homogenizoval rozdílné vlastosti drobných struktur, které již nejsou pro model tolik podstatné.

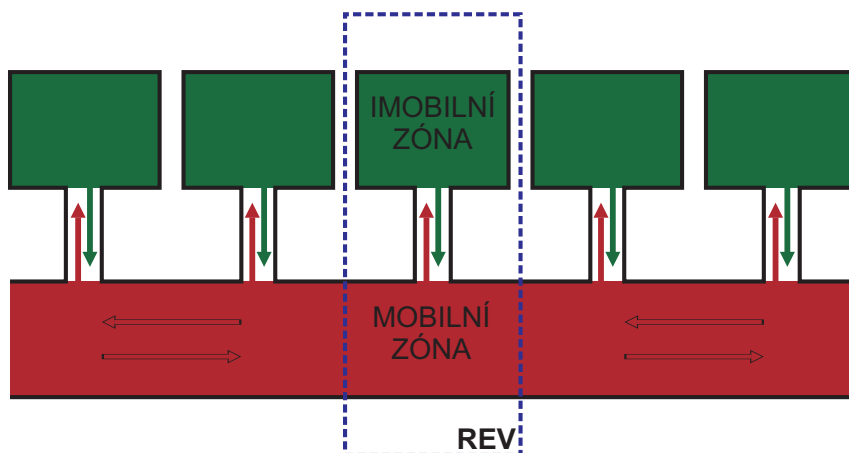
Volba REV vždy záleží na konkrétní oblasti a na strukturách, v ní se vyskytujících. Při vhodné volbě je výpočet dostatečně rychlý a přitom nezanedbává podstatné parametry úlohy. Na volbě REV tedy závisí kvalita řešení a doba jeho výpočtu.

Modely proudění a transportu v porézním prostředí jsou založeny na Darcyho zákoně a rovnici kontinuity (viz sekce 2.4).

2.2.2 Dvojí porozita

V obecném významu se jedná rovněž o porézní prostředí, ale vedle vzájemně propojených pórů uvažujeme i póry slepé. Opět homogenizujeme přes REV, ale zvláště přes póry průtočné a póry slepé. Dostáváme tak mobilní a imobilní zónu, které souhrnně označujeme jako dvojí kontinuum (obr. 4) [5].

V mobilní zóně probíhá běžné konvektivní proudění. V imobilní zóně dochází ke změnám či přenosům hmoty až ve spojení se zónou mobilní. Vlivem gradientu koncentrace se hmota přesouvá směrem k vyrovnání koncentrací v obou zónách. Míru, s jakou rychlostí k vyrovnávání koncentrací dochází, vyjadřuje koeficient nerovnovážné interakce α . Touto interakcí je teoreticky provázán každý jednotlivý bod v jedné zóně s odpovídajícím bodem zóny druhé. V diskretizované numerické reprezentaci v modelu jsou takto svázány jednotlivé elementy, jakožto základní prvky.

Obrázek 4: *Dvojí kontinuum.*

Uplatnění dvojí porozity při aproximaci puklinového prostředí je v nahrazení dominantních puklin mobilní zónou a okolní matrice zónou imobilní.

2.2.3 Diskrétní puklinová síť

Na základě znalosti rozložení puklin lze vytvořit statistický model puklinového prostředí. Model je dostatečně přesný, ale výpočetně velmi náročný. Úloha větších rozměrů není řešitelná z důvodu omezených výpočetních kapacit dnešních počítačů.

2.2.4 Kombinované přístupy

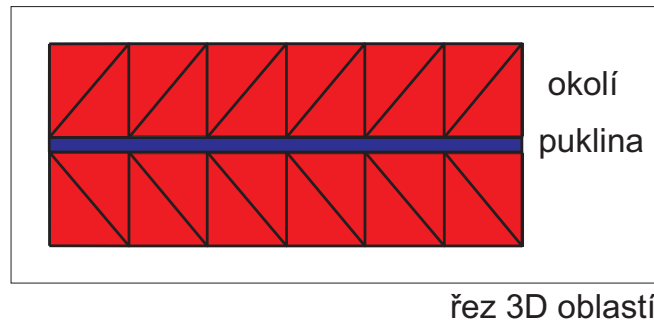
Snahou je spojit výhody předešlých přístupů. Jednou z možností je použití modelu porézního prostředí nebo prostředí s dvojí porozitou. Parametry modelu budou nastaveny z výsledků modelů menších bloků, řešených přesně pomocí metody diskrétní puklinové sítě. Další možností je kombinace modelu diskrétní puklinové sítě s porézním prostředím. Pomocí diskrétní puklinové sítě jsou modelovány dominantní puklinové struktury, zatímco okolní méně významné struktury jsou nahrazeny porézním prostředím s odpovídajícími parametry. Existují i další přístupy. Dva z nich jsou zmíněny v následující sekci 2.3.

2.3 Porovnávání přístupů

Cílem práce je srovnat vlastnosti a vzájemnou nahraditelnost dvou typů reprezentace puklinového prostředí. Oba jsou založeny na diskrétní puklinové síti, která by při reprezentaci všech puklin v oblasti byla samostatně značně výpočetně náročná. Proto je kombinována s dalšími přístupy.

2.3.1 Aproximace 1D, 2D a 3D prvky

Jedním z přístupů k aproximaci puklinového prostředí je využití diskrétní puklinové sítě a porézního prostředí. Dominantní pukliny v oblasti vyjádříme konečnými prvky odpovídající dimenze s vysokou hydraulickou vodivostí. Okolní struktury drobných puklin nahradíme 3D prvky porézního prostředí s malou vodivostí. Na obr. 5 je řez zjednodušeným 3D prostředím, obsahující pouze jedinou dominantní puklinu a její okolí.



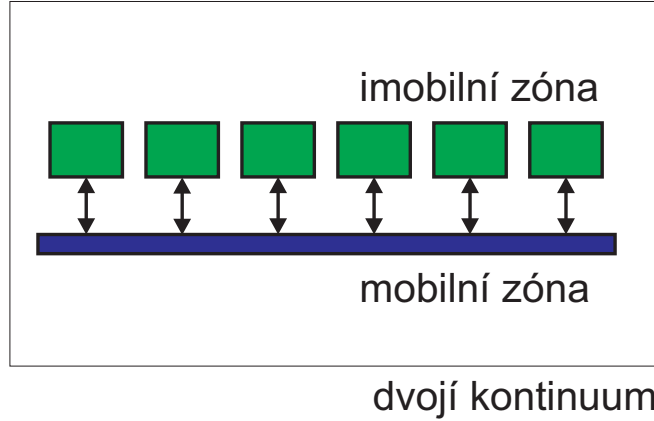
Obrázek 5: Řez 3D puklinovým prostředím. Puklina je reprezentována 2D elementy a její okolí elementy 3D.

Ve 3D elementech porézního prostředí reprezentujících struktury přiléhající k dominantní puklině dochází ke stejným dějům jako v puklině samotné, tedy např. konvektivnímu transportu látky. Rychlost je však vlivem nízké hydraulické vodivosti malá.

2.3.2 Aproximace s využitím dvojí porozity

Druhou možností popisu puklinového prostředí je model kombinující diskrétní puklinovou síť s dvojí porozitou. Dominantní pukliny interpretujeme elementy stejné dimenze jako v předchozím příkladu jakožto mobilní zónu. Nebudeme však již uvažovat elementy vyšší dimenze. Využijeme elementy popisující puklinu a na

nich definovanou imobilní zónu pro nahrazení drobných puklin přilehlých k puklinám dominantním. Výhodou je značné snížení počtu elementů potřebných k popisu úlohy a přitom jen drobný výpočet zohledňující interakci obou zón navíc.



Obrázek 6: Řez 3D oblastí s jedinou dominantní puklinou. Puklina reprezentována 2D elementy a okolí imobilní zónou.

K interakci v rámci samotné imobilní zóny v tomto případě nedochází. Ke změnám koncentrace látky v imobilní zóně dochází pouze interakcí se zónou mobilní.

2.4 Proudění a transport látky puklinovým prostředím

Uvažujeme horninovou strukturu plně saturovanou v celém svém objemu. Všechny pukliny a póry v oblasti jsou tedy vyplněny kapalinou. V této kapalině uvažujeme rozpuštěnou látku (kontaminant) o koncentraci

$$c(x, t) \quad \left[g/m^3 \right],$$

závislé na místě a čase.

Proudění kapaliny takovým prostředím je popsáno pohybovou rovnicí a rovnicí bilance hmoty. Pohyb kapaliny vyjadřujeme Darcyho zákonem

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla\phi, \quad (1)$$

kde \mathbf{q} je vektor Darcyovské rychlosti a $\nabla\phi$ je gradient piezometrické výšky ϕ , definované vztahem, závislým na tlaku a z-souřadnici polohy

$$\phi = z + \frac{p}{\rho g}.$$

ρ je hustota kapaliny a g je tíhové zrychlení.

Koeficient hydraulické vodivosti K je tenzor druhého řádu se složkami, které jsou v případě nehomogenního prostředí funkcí prostorových souřadnic. Vyskytuje se situace, kdy hlavní směry anizotropie přibližně odpovídají kartézským souřadnicím a Darcyho zákon lze použít ve formě soustavy rovnic pro směry jednotlivých os souřadnic.

V libovolně zvoleném objemu musí platit, že změna hmotnosti vody bude odpovídat hmotnosti vody prošlé přes hranici a změně dané zdroji. To postihuje rovnice bilance hmoty

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \frac{P}{n}, \quad (2)$$

kde P je hustota zdrojů a n je porozita, tedy podíl objemu pórů v REV a celému objemu REV.

Při proudění kapaliny horninou dochází zákonitě také k transportu látky v kapalině rozpuštěné. Základní uvažované transportní mechanismy jsou konvekce, hydrodynamická disperze a nerovnovážná interakce (dvojí porozita).

Při konvekci je látka přenášena vlivem pohybu celého roztoku, zatímco při difuzně - disperzních dějích dochází k pohybu rozpuštěné látky vlivem gradientu koncentrace z míst s vyšší koncentrací do míst s koncentrací nižší. Testované modely jev hydrodynamické disperze nezahrnují, podobněji je vyloženo v [6], [7] a [11].

Dvojí porozita je vlastnost horniny, která má rovněž vliv na transport látky. Působí retardaci šíření koncentrace horninou. Vlivem gradientu koncentrace mezi mobilní a imobilní zónou dochází k jejich vyrovnání rychlostí, odpovídající koeficientu nerovnovážné interakce.

Systém rovnic je

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + \nabla \cdot (c_m \mathbf{v}) - \nabla \cdot (D \nabla c_m) = \frac{1}{n_m} \alpha (c_i - c_m), \quad (3)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{1}{n_i} \alpha (c_i - c_m), \quad (4)$$

kde c_m, c_i jsou mobilní a imobilní koncentrace, $D(v)$ je difuzní tenzor, v je transportní rychlost, n_m, n_i mobilní a imobilní porozita a α koeficient nerovnovážné interakce. Problematika je podrobněji vyložena v [7] a [8].

3 Popis numerických metod

3.1 Řešení úlohy proudění

Převážnou většinu úloh proudění nelze řešit analyticky. Proto pro jejich řešení používáme numerické metody. Těch existuje celá řada, např. metoda konečných diferencí, metoda konečných objemů, nebo metoda konečných prvků (MKP), která má mnoho výhod. Těmi hlavními jsou možnost užití libovoného tvaru oblasti a relativně jednoduchá algoritimizovatelnost.

Pro řešení úloh proudění v této práci je použita smíšená hybridní formulace metody konečných prvků, podrobněji popsána v [9] a [10].

Smíšená hybridní formulace spočívá ve slabém splnění Darcyho zákona (1), bilanční rovnice (2) a okrajových podmínek nejprve zvlášť na každém elementu definované oblasti. Poté je proveden součet přes všechny elementy na oblasti, do něhož se započítá mezielementový tok. Výhodou je přímý výpočet filtrační rychlosti u a vyrovnaná bilance toku na každém elementu. Velkou nevýhodou je fakt, že smíšená hybridní formulace vede na soustavu rovnic, popsatelnou symetrickou indefinitní maticí.

3.2 Řešení úlohy transportu

Na vypočteném rychlostním poli z úlohy proudění počítáme transport upwind schématem. Na jednotlivých elementech určujeme koncentraci v dalším časovém kroku z hodnot koncentrace v kroku předchozím přetokem mezi sousedícími elementy. Výsledné koncentrace jsou použity v dalším cyklu jako vstupní. Cyklus je prováděn, dokud neproběhne celý zadaný časový interval.

Uvažována je pouze konvektivní složka transportu a vlastnost dvojí porozity. Transportem látky v podzemním prostředí se zabývají práce [11] a [12].

3.2.1 Metoda rozkladu operátoru

Fyzikální vlastnost dvojí porozity je k výpočtu transportu přiřčena metodou rozkladu operátoru.

Principem metody je oddělení popisu a následně i řešení jednotlivých fyzikálních jevů od sebe. Metoda svou obecností umožňuje výhodně volit optimální diferenční schémata pro jednotlivé fyzikální jevy, nebo numerický výpočet nahradit výpočtem analytickým, je-li jím úloha řešitelná.

Rovnice, popisující zvlášť jednotlivé jevy, jsou diskretizovány příslušnými metodami, čímž dostaneme diferenční operátory pro jednotlivé jevy.

- \mathcal{A} - operátor konvekce,
- \mathcal{B} - operátor nerovnovážné interakce.

Při řešení úlohy pak jednotlivé operátory během každého časového kroku postupně aplikujeme na vektor koncentrací, čímž dostaneme nový vektor koncentrací v čase o Δt vyšším.

$$\mathbf{c}^t \xrightarrow{\mathcal{A}} \mathbf{c}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \xrightarrow{\mathcal{B}} \mathbf{c}^{t+\Delta t} \quad (5)$$

Operátor dvojí porozity je dán diferenciálními rovnicemi (3) a (4) bez konvektivního a difuzivního členu. Rovnice jsou řešitelné analyticky. Pro mobilní a imobilní zónu dostáváme vztahy

$$c_m(t) = \left(c_m^{(0)} - \bar{c}^{(0)}\right) e^{-\alpha \frac{n_m+n_i}{n_m n_i} t} + \bar{c}^{(0)} \quad (6)$$

pro mobilní zónu,

$$c_i(t) = \left(c_i^{(0)} - \bar{c}^{(0)}\right) e^{-\alpha \frac{n_m+n_i}{n_m n_i} t} + \bar{c}^{(0)} \quad (7)$$

pro imobilní zónu, kde

$$\bar{c}^{(0)} = \frac{n_m c_m + n_i c_i}{n_m + n_i} \quad (8)$$

- $c_m(t)$ [g/m^3] je koncentrace látky v mobilní zóně,
- $c_i(t)$ [g/m^3] koncentrace látky v imobilní zóně,
- n_m [1] porozita v mobilní zóně,
- n_i [1] porozita v imobilní zóně.

Výstup operátoru konvekce, kterým je rozložení koncentrací na elementech v oblasti, je použit jako vstup pro dvojí porozitu. Jsou přepočteny nové hodnoty koncentrací a uloženy do proměnných, které v dalším cyklu načítá operátor konvekce jako vstupní data.

4 Program

Konzolový program, napsaný v jazyce C, počítá v návaznosti na sebe úlohu proudění a úlohu transportu.

V úloze proudění se metodou konečných prvků počítá proudové pole a rozložení tlaků na oblasti.

V úloze transportu se v závislosti na vypočteném proudovém poli stanovuje posun koncentrace rozpuštěné látky v kapalině, proudící oblastí.

Samotná úloha je zadána řídicím souborem `.ini`, který se mimo jiné odkazuje na datové soubory popisující konkrétní parametry úlohy.

4.1 Struktura vstupů programu

Program je spuštěn souborem `flow123d.exe` se dvěma parametry, které určují, že půjde o výpočet smíšené hybridní MKP na problému s ustáleným a neustáleným prouděním a definují název řídicího souboru úlohy.

4.1.1 Řídicí soubor `.ini`

Řídicí soubor obsahuje popis úlohy, parametry jejího spuštění, odkazy na datové struktury úlohy a volby spouštění dílčích výpočtů. Soubor je rozčleněn do několika sekcí. Jsou jimi:

- Global (popis úlohy a dobu trvání sledované simulace)
- Input (datové soubory pro síť, materiál, okrajové podmínky a sousedství jednotlivých elementů)
- Run (soubor pro uložení informací z průběhu výpočtu, stupeň množství výpisu informací při běhu)
- Solver (volba typu řešiče, jeho přesnost)
- Solver parameters (parametry vnitřního řešiče)
- Output (definice parametrů výstupu a výstupních souborů)
- Transport (výpočet transportu a dvojí porozity, definice výstupních souborů pro transport)

- Constants (fyzikální konstanty)

Následuje příklad řídicího souboru:

```
[Global]
Problem_type =1
Description  =00_uloha_01:2D area with 1D zigzag canal(1000 long)
stop_time   =1000
save_step    =100

[Input]
File_type    =1
Mesh         =kanal_test.msh
Material     =kanal_test.mtr
Boundary     =kanal_test.bcd
Neighbouring =kanal_test.ngh

[Run]
Log_file     =00_uloha_01_6.log
Screen_verbosity =7
Log_verbosity  =7
Pause_after_run =Yes

[Solver]
Keep_solver_files =Yes
Manual_solver_run =No
Use_control_file  =No
Control_file      =pokus.in
Solver_accuracy   =1e-7
Solver_name       =matlab

[Solver parameters]
Solver_accuracy   =1e-7
it_meth           =35
restart           =0
max_it            =500
pr_typ            =40
```

```
drfl          =1e-9;  k ILU
l_size        =80;   k ILU

[Output]
Write_output_file =Yes
Output_file      =results.pos
Output_digits    =12
Cross_section    =Yes
Cs_params        =0 2.5 0 1 0 0 0.1
Cs_results_run   =No
Cs_results_final =Yes
;output_file_type =2
Specify_elm_type =Yes
Output_elm_type  =1

[Transport]
Transport_on      =Yes
Dual_porosity    =No
Alpha            =0.0008
Mobile_porosity  =0.218
Immobile_porosity =0.782
Concentration     =kanal_test.con
Transport_BCD     =kanal_test.tbc
Transport_out     =transport.pos
Transport_out_im  =transport_im.pos
N_Substances     =1
subst_names      =h

[Constants]
g                =9.81
rho              =1
```

Předchozí výpis řídicího souboru je pro úlohu proudění a transportu na 2D oblasti délky 1000 s klikatou 1D puklinou a okolím reprezentovaným 2D elementy. Doba trvání simulace je zadána 1000 a ukládán bude každý stý krok. V sekci Input jsou názvy vstupních datových souborů s geometrií úlohy. Je po-

užit vnější řešič Matlab. Bude počítán transport bez využití dvojí porozity. Výstupem bude soubor `results.pos` s výsledky proudění, soubor `transport.pos` s výsledky transportu na celé oblasti a soubor s koncentracemi z řezu oblastí.

4.1.2 Datové soubory úlohy

Všechny datové soubory obsahují formální hlavičku následovanou celkovým počtem daného typu položek v souboru. Dále jsou už samotná data.

Soubor `.msh` obsahuje polohy uzlů sítě a seznam všech elementů. Jednotlivé hodnoty mají význam číslo uzlu a x , y a z souřadnice. Další část souboru obsahuje data elementů, která jsou podobně zadána jako číslo elementu, typ elementu, čísla uzlů tvořících element atd.

Soubor `.mtr` předává materiálové parametry. V každém řádku je číslo materiálu, typ materiálu a příslušný počet koeficientů. V souboru `.bcd` jsou zadány okrajové podmínky pro proudění. Každá podmínka je přiřazena ke konkrétnímu elementu či jeho hraně a je na ni zadána potřebná veličina. V našem případě jsou okrajové podmínky zadány na strany elementů a zadán je tlak. Soubor `.ngh` je generován ze souboru `.msh` a obsahuje informace o vzájemně sousedících elementech.

Další dva vstupní soubory mají význam pro transport. Prvním je soubor `.tbc`, zadávající transportní okrajové podmínky. Ty musejí být zadány na každém místě, kde je zadána okrajová podmínka pro proudění. Druhým souborem je `.con`, který definuje počáteční podmínku na oblasti, tedy počáteční koncentraci látky na každém elementu.

4.2 Výpočetní část

Způsob výpočtu proudění je diskutován v [10].

Transport se počítá na základě výsledků výpočtu proudění v cyklu po jednotlivých časových krocích. Počet cyklů výpočtu je určen podílem délky časového kroku a celkové doby simulace, zadané v řídicím souboru. Časový krok je z geometrie sítě a proudového pole vypočten jako podíl rozměrů elementu a toku elementem. Vybrána je nejmenší hodnota podílu ze všech elementů.

Samotný výpočet nové koncentrace v dalším časovém kroku je pak počítán přes hmotnosti rozpuštěné látky. Koncentrace na elementu je vynásobena objemem elementu, dostáváme tedy hmotnost. Výsledný přesun látky je dán tokem přes hranici elementu, množstvím látky v elementu a časovým krokem, po který

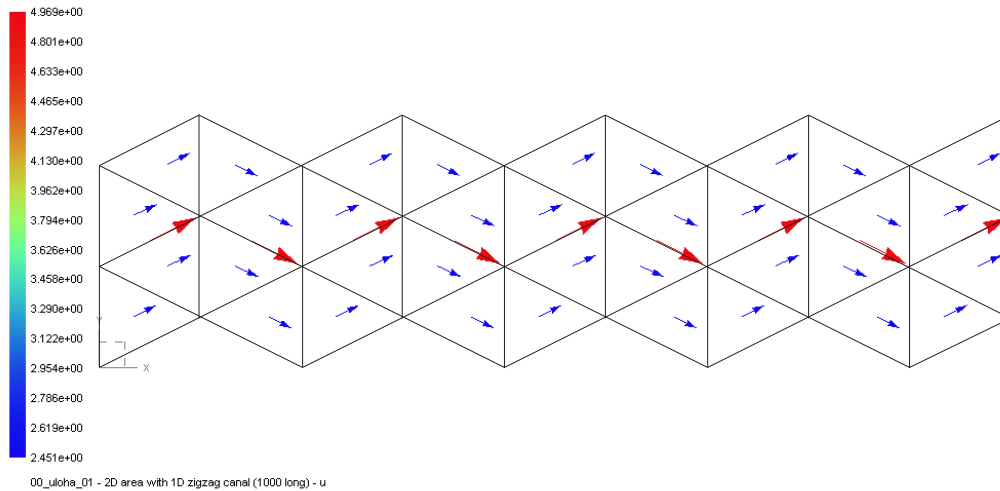
přetok v jednom kroku cyklu sledujeme. Výsledek je přes objem přepočten zpět na koncentraci.

Podle zadání byl do programu implementován výpočet dvojí porozity. K jeho začlenění do výpočtu transportu bylo použito metody rozkladu operátoru, vysvětlené v sekci 3.2.1. Její použití je jednou z voleb v řídicím souboru. Počítá se v každém cyklu výpočtu transportu. Jako počáteční podmínka je zadána nulová koncentrace látky v imobilní zóně všech elementů. Provádí se výpočet transportu v cyklu přes všechny elementy. Výstupní koncentrace po aplikaci operátoru konvekce je použita jako vstup pro dvojí porozitu (viz vztahy 6 a 7). Je vypočtena koncentrace v imobilní zóně a upravena koncentrace v zóně mobilní. Hodnoty jsou uloženy do struktury elementu a v dalším cyklu jsou použity jako vstupy.

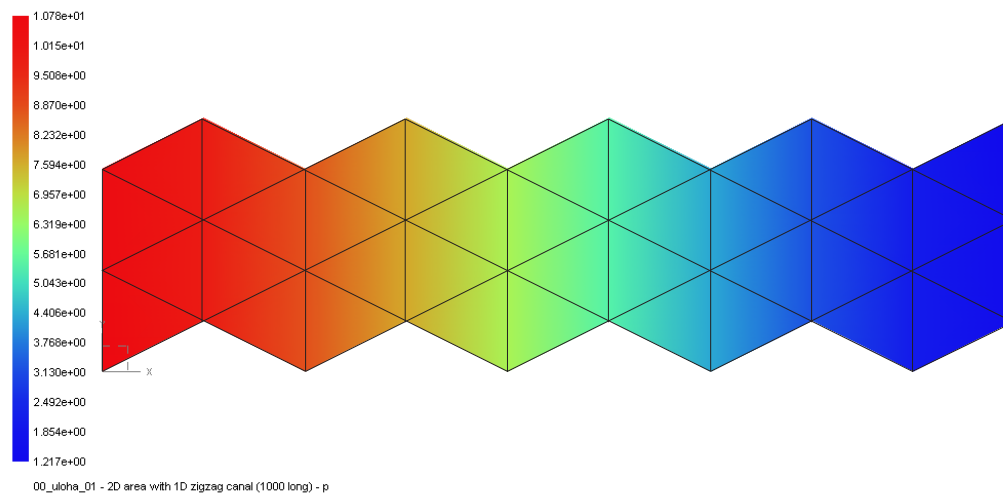
4.3 Výstupy programu

4.3.1 Výstupy do Gmsh

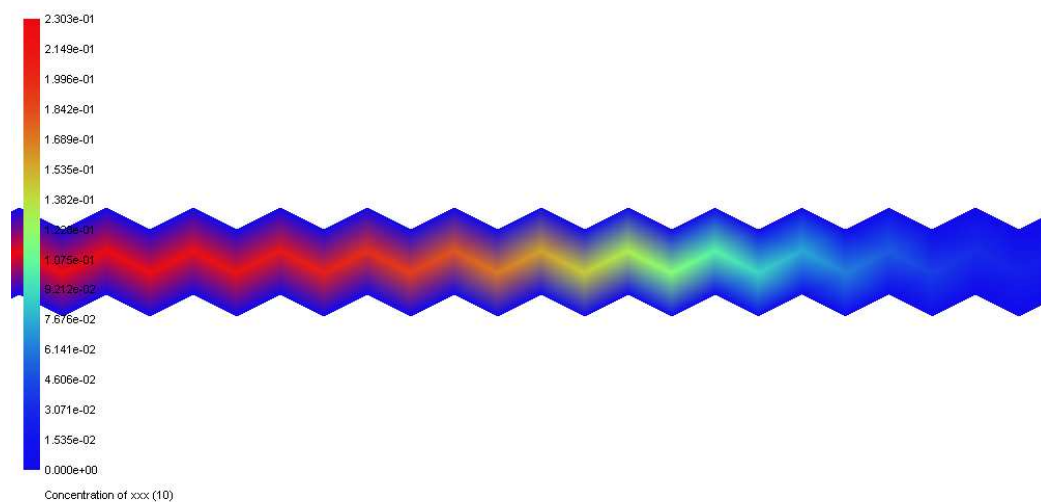
Výstupy úlohy proudění jsou pole rychlostí a rozložení tlaku, zobrazitelné programem Gmsh (obr. 7, 8). Barevná škála vlevo ukazuje hodnoty dané veličiny na oblasti. Pro názornost je použit jiný rozměr oblasti. Testy pak byly prováděny na úloze rozsáhlejší.



Obrázek 7: Ukázka pole rychlostí na jednoduché oblasti s puklinou, vypočtených smíšenou hybridní formulací MEP.

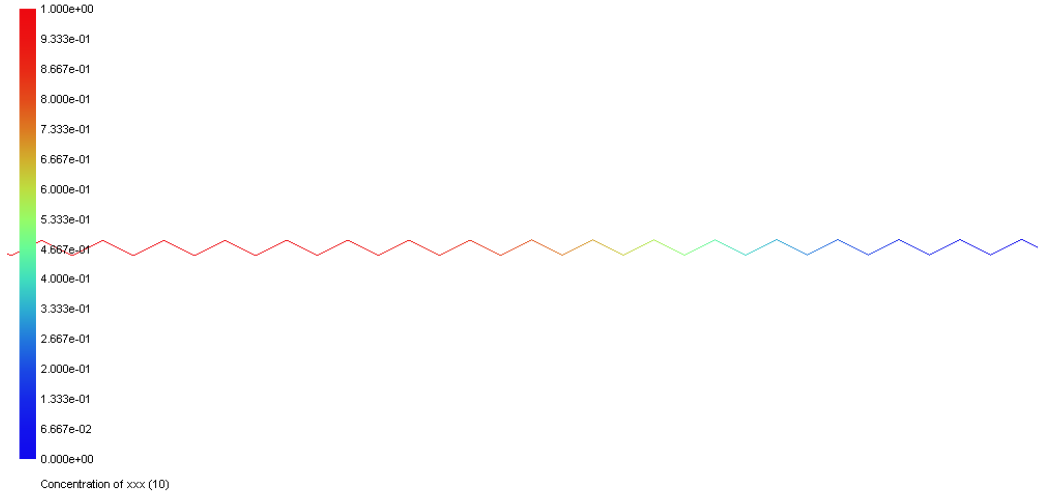


Obrázek 8: Ukázka rozložení tlaků, vypočtených smíšenou hybridní formulací MEP.



Obrázek 9: Čelo koncentrace šířící se puklinou (výřez délky 50 z oblasti délky 1000). Okolí pukliny tvoří 2D elementy, do kterých se látka téměř nešíří.

Výstupy 2D úlohy transportu jsou rovněž zobrazeny v Gmsh. Na obr. 9 je vidět čelo koncentrace postupující centrální puklinou. Okolí tvoří 2D elementy, do kterých se látka téměř nešíří.



Obrázek 10: *Transport látky 1D puklinou s dvojitou porozitou (výřez délky 50 z oblasti délky 1000).*

Na dalším obrázku (10) je vidět úloha s 1D puklinou s dvojitou porozitou. Znárodně je opět čelo šířící se koncentrace.

Předchozí obrázky jsou málo názorné pro porovnávání obou typů úloh. Proto bylo použito proložení oblasti přímkou. Do grafu byly brány koncentrace na elementech ležících ve zvoleném okolí přímky.

4.3.2 Výstupy řezu oblastí

Slouží ke zobrazení průběhu koncentrace v oblasti podél zvolené přímky. V řídicím souboru je definována přímka a velikost jejího okolí. Volba struktur, nesoucích informaci o koncentraci v daném místě, je možná provést více způsoby. Je třeba vybrat optimální vzhledem ke konkrétní geometrii úlohy. Možnostmi jsou:

- Koncentrace na uzlech
- Koncentrace na elementech

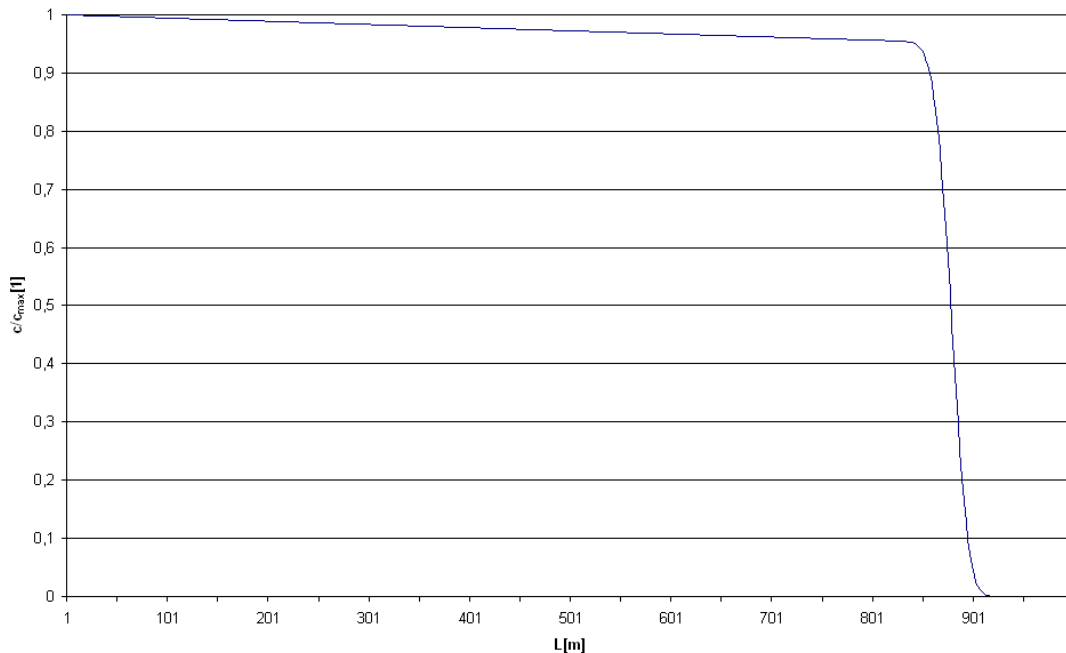
Výhodou volby uzlů je jednoznačná poloha, a tedy jasné rozhodování, leží-li uzel ve zvoleném okolí přímky či nikoliv. Koncentrace je však na uzly přepočítávána průměrováním z okolních elementů, zanášíme tedy do výsledků chybu.

Volba elementů jako vhodných struktur však není jednoznačná. U elementu, jakožto útvaru s jistým rozměrem, je třeba definovat, kdy leží v požadovaném okolí:

- leží-li alespoň jeden jeho uzel v daném okolí řezu
- leží-li těžištěm v daném okolí řezu
- leží-li celou délkou (1D), plochou (2D) nebo objemem (3D element) v daném okolí řezu

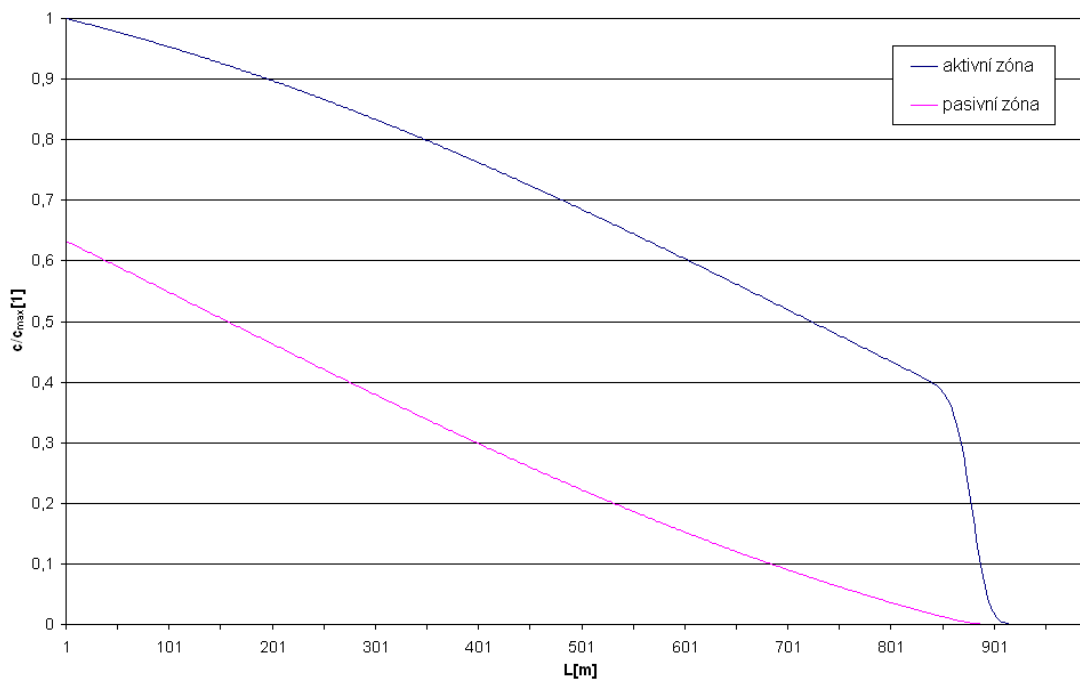
Pro testování úloh v této práci byla zvolena varianta vyhodnocující polohu těžiště. Při zápisu do výstupního souboru jsou pak uvažovány pouze elementy, které svým těžištěm leží ve vymezené oblasti. Do výstupního souboru je zapsána poloha na přímce a koncentrace na příslušném elementu.

Výsledný graf zobrazuje rozložení koncentrace podél zvolené přímky. Na obrázku 11 je znázorněno rozložení koncentrace v puklině na úloze bez dvojí porozity.



Obrázek 11: Koncentrace v puklině na 2D úloze.

Na dalším obrázku (12) je vidět podobná situace na úloze s dvojí porozitou.



Obrázek 12: *Koncentrace v mobilní a imobilní zóně na 1D úloze.*

5 Testovací úlohy

Pro přehlednost vyhodnocení vlastností obou modelů byla k testovacím výpočtům zvolena 2D úloha s jedinou dominantní puklinou a pro dané účely různě interpretovaným okolím (viz následující sekce). Výsledky získané na této úloze jsou ekvivalentní výsledkům úlohy vyšší dimenze, jejíž studium bylo zadáno.

Celá úloha je definována jako 2D. Dominantní puklina je reprezentována 1D elementy a její okolí v závislosti na použité aproximaci buď 2D elementy porézního prostředí s vlastnostmi odpovídajícími nahrazované struktuře nebo imobilní zónou dvojí porozity.

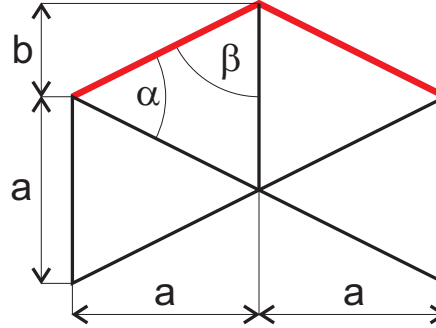
5.1 Základní parametry úlohy

Byla zvolena horizontálně orientovaná oblast délky 1000, kterou prochází klikatá puklina. Klikatá puklina byla zvolena z výpočetních důvodů.

Protože se v úloze transportu nezabýváme difúzně - disperzními jevy, chybí mechanismy, které by reprezentovaly šíření transportované látky ve směru kolmém na konvektivní proudění. V případě pukliny rovné by tedy nedocházelo k šíření látky do jejího okolí. K tomu však v realitě dochází a bylo třeba tento jev

zahrnout. Geometrii s klikatou puklinou dodáváme úloze při numerickém řešení větší numerickou difuzi, která supluje efekt fyzikálního procesu hydrodynamické disperze.

Puklina je reprezentována 1D elementy, na obr. 13 vyznačeny červeně. Rozměry jsou $a = 2$, $b = 1$, $\alpha = 2 \cdot \arctg\left(\frac{b}{a}\right)$, $\beta = \arctg\left(\frac{a}{b}\right)$



Obrázek 13: Rozměry elementů

Definována je počáteční podmínka jako nulová koncentrace na všech elementech oblasti. Okrajové podmínky jsou definovány na vtoku a výtoku oblasti. Na levém okraji oblasti je definována vtoková okrajová podmínka zadaným tlakem pro výpočet proudění a zadanou vstupující koncentrací látky pro výpočet transportu. Na pravém okraji je definována výtoková okrajová podmínka. Pro proudění rovněž tlakem a pro transport nulovým tokem hmoty z oblasti.

Na levém okraji je zadán tlak $p_1 = 110,8$ a na pravém $p_2 = 1,0$. Jejich rozdílem, koeficientem hydraulické vodivosti pukliny $K = 10$ a délkou pukliny $L = 1000$ je dána rychlost proudění kapaliny podle zjednodušeného vztahu

$$q = K \frac{p_2 - p_1}{L} \cong 0,98. \quad (9)$$

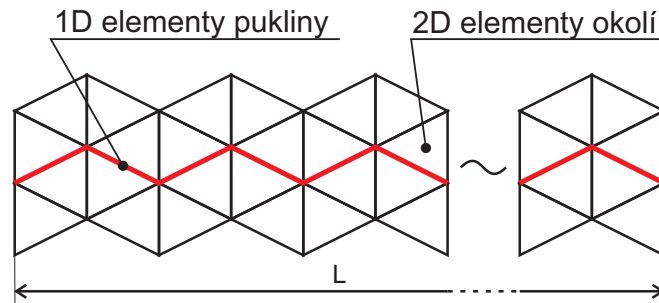
Samotá geometrie úlohy je definována v souboru `.msh`, který obsahuje výčet jednotlivých uzlů a elementů sítě. Dalším vstupem je soubor `.ngh`, definující sousedství jednotlivých elementů. Soubor `.con` určuje počáteční koncentraci látky na jednotlivých elementech. Soubor `.bcd` definuje již zmíněné okrajové podmínky pro proudění a soubor `.tbc` okrajové podmínky pro transport. Vlastnosti jednotlivých materiálů, vyskytujících se v oblasti jsou definovány v souboru `.mtr`. Celý výpočet je řízen souborem `.ini`.

5.2 Úloha pro dominantní puklinu s okolím aproximovaným porézním prostředím

V tomto případě je puklina, reprezentovaná 1D elementy, obklopena 2D elementy, jak je znázorněno na obr. 14. Z výpočetních důvodů musí mít každý element objem. Proto je pro 1D elementy definován jednotkový příčný průřez a pro 2D elementy jednotková tloušťka. 2D elementy reprezentují prostředí přiléhající k puklině jako by šlo o prostředí porézní. Jeho parametry však v sobě zahrnují jak drobné puklinové systémy na dominantní puklinu navazující, tak i porézní strukturu základní horniny. Stejnětak i elementy pukliny uvažujeme jako porézní prostředí s definovanou vysokou vodivostí.

Vezmeme-li tedy jeden element pukliny a k němu náležící 4 elementy okolí, jak je tomu v aproximaci (viz obr. 14), vycházejí objemy pukliny $V_1 \cong 2,236$ a okolí $V_2 = 8$. Poměr objemů je tedy $V_1/V_2 \cong 0,218/0,782$. Tento poměr je využit pro porozity v aproximaci úlohy s imobilní zónou.

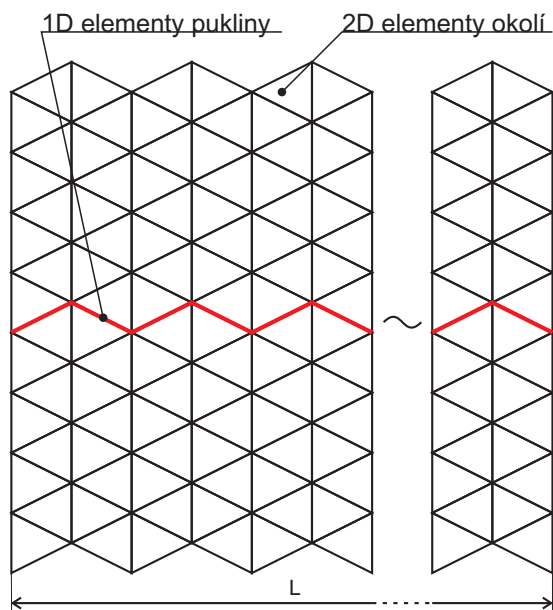
Obě struktury, jak puklina tak i okolí, jsou v úloze popsány koeficienty hydraulické vodivosti. Tyto hodnoty jsou dány definovaným materiálem. V testovacích výpočtech jsou pak použity různé poměry hydraulické vodivosti pukliny a jejího okolí. Tyto poměry pak rozhodují o podílu jednotlivých struktur na celkovém proudění a transportu.



Obrázek 14: Úloha s dominantní puklinou, aproximovanou 1D elementy a jejím horninovým okolím nahrazeným 2D elementy.

Okrajová podmínka pro transport je definována všude tam, kde je zadána nějaká okrajová podmínka pro proudění. Jednotková vstupní koncentrace je však definována pouze na vstupu do pukliny. Na ostatních místech vstupu oblasti je zadána koncentrace nulová. Tato konfigurace se v případě vysoké vodivosti pukliny a nízké vodivosti okolí, k čemuž v reálném případě dochází, jeví jako vhodná.

Pro porovnání vlivu velikosti okolí byla využita úloha podobná, pouze s větším počtem 2D elementů reprezentujících okolí pukliny (viz obr. 15). Zde vychází jiný poměr objemů pukliny a okolí. Stejný poměr pak byl opět použit v aproximaci s dvojí porozitou.



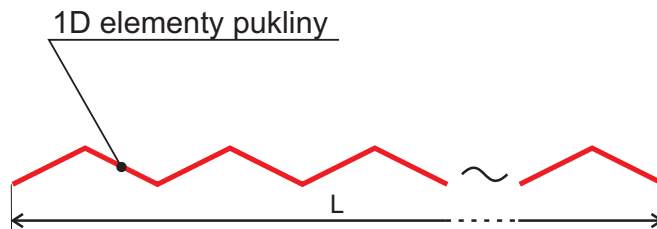
Obrázek 15: Úloha s 1D puklinou a jejím okolím, nahrazeným více 2D elementy.

5.3 Úloha pro dominantní puklinu s okolím aproximovaným imobilní zónou

Zde je puklina podobně jako v předchozím případě reprezentována 1D elementy. Každý element však v sobě nese pouze informaci o koncentraci látky v daném místě pukliny, ale zároveň také informaci o imobilní zóně. Tou nahrazujeme okolní struktury k puklině přiléhající. Každý element tedy proti předchozímu modelu nese informaci navíc, ale nevyskytují se zde již elementy vyšší dimenze. Výsledný počet elementů je tedy výzorně nižší.

K reprezentaci pukliny opět využijeme modelu porézního prostředí s daným koeficientem hydrodynamické vodivosti.

Kromě zmíněných koncentrací v puklině (mobilní zóně) a okolí (imobilní zóně) patří k tomuto modelu ještě parametry mobilní a imobilní porozity a koeficient nerovnovážné interakce. Porozity udávají poměr akumulčních kapacit vůči celému objemu REV. Jejich hodnoty byly nastaveny ve stejném poměru jako je



Obrázek 16: Úloha s dominantní puklinou aproximovanou 1D elementy. Okolí pukliny je reprezentováno imobilní zónou. Informace o koncentracích v ní je nenesena elementy dominantní pukliny.

poměr objemů pukliny a jejího okolí v porovnávané aproximaci bez dvojí porozity. Koeficient nerovnovážné interakce vystihuje vzájemnou komunikaci mezi zónami.

Okrajová podmínka pro transport je podobně jako v předchozím modelu zadána jako jednotková koncentrace pouze na vstupu do pukliny.

6 Výsledky modelů

Úkolem bylo srovnat možnost reprezentace puklinového prostředí dvěma kvalitativně odlišnými modely. K porovnání byla použita úloha s jednou klikatou puklinou, jejíž okolí bylo reprezentováno v prvním případě 2D elementy porézního prostředí a v případě druhém imobilní zónou (viz sekce 5).

Aproximace úlohy s okolím je určena svou geometrií, tedy rozměry pukliny a jejího uvažovaného okolí a hodnotami hydraulické vodivosti pukliny a okolí. Aproximace úlohy s dvojí porozitou je určena rozměrem pukliny, koeficientem nerovnovážné interakce a porozitami mobilní a imobilní zóny. Předpokladem bylo, že tyto parametry se vzájemně mohou ovlivňovat a vzájemné svázání obou úloh nějakým vztahem bude obtížné.

Jako referenční byla zvolena aproximace první (viz sekce 5.2), která je prakticky již používána. Na ní byly provedeny výpočty pro různé poměry hydraulické vodivosti pukliny a okolí. Dalším krokem bylo k jednotlivým parametrům nalézt parametry pro aproximaci s dvojí porozitou tak, aby se výsledné průběhy koncentrace co nejvíce shodovaly. Dále se pokusit nalézt závislost mezi parametry dvojí porozity a hydraulickými vodivostmi, aby úlohy mohly být obecně vzájemně nahraditelné.

Na referenční úloze byly provedeny výpočty pro poměry hydraulických vodi-

vostí pukliny a okolí $10^8 - 10^0$ (viz tabulka 1).

K^{1D}	K^{2D}	K^{1D}/K^{2D}
10	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^8$
10	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^5$
10	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^4$
10	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^3$
10	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^2$
10	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^1$
10	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^0$

Tabulka 1: *Tabulka hydraulických vodivostí, použitých při výpočtech na úloze s okolím aproximovaným porézním prostředím. K^{1D} je vodivost pukliny a K^{2D} vodivost okolí.*

Pro vysoké hodnoty poměru hydraulických vodivostí se křivka rozložení koncentrací výrazně neměnila. S klesajícím poměrem začaly stoupat velikosti změny, až při poměrech na druhé hranici testovaného intervalu už mezi jednotlivými řády docházel ke značné změně. Tento trend je patrný z obrázků 17, 18, 19, 20, 24, 26 a 27.

Křivky rozložení koncentrací jsou vykreslovány podél zvoleného řezu oblastí (viz sekce 4.3.2). Ten je veden středem oblasti pro zobrazení pukliny a přes 2D elementy okolí. Křivka vyjadřující koncentraci v okolí pukliny je dána průměrem přes elementy okolí náležící k odpovídajícímu elementu pukliny.

Pro porovnání vypočtených průběhů s výsledky druhého typu aproximace, pomocí dvojí porozity, bylo třeba nejprve nastavit základní parametry. Jde o hodnoty parametrů mobilní n_m a imobilní n_i porozity a koeficientu nerovnovážné interakce α .

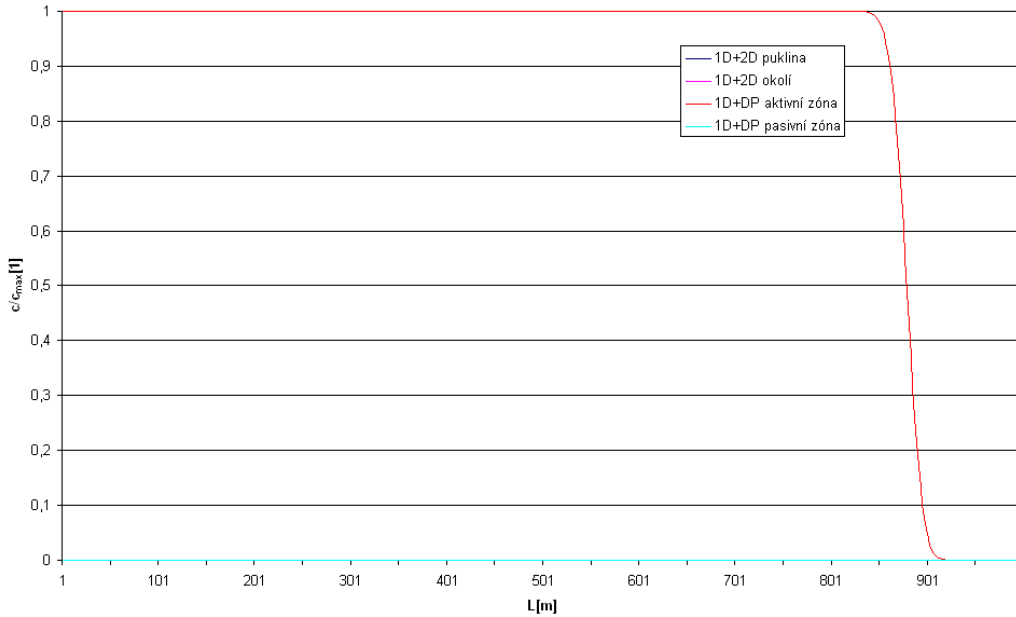
Vhodně nastavovány a vzájemně porovnávány byly tedy parametry obou aproximací, znázorněné v tabulce 2.

1D + 2D	1D + DP
$V_{pukliny}$	$V_{pukliny}$
V_{okoli}	n_m, n_i
K^{1D}, K^{2D}	α

Tabulka 2: *Tabulka nastavitelných parametrů dvou porovnávaných aproximací.*

Hodnoty porozit, jak už bylo zmíněno v kapitole 5, byly nastaveny ve stejném poměru, jako poměry objemů pukliny a elementů okolí v referenční úloze. Tedy na hodnoty $n_m = 0,218$ a $n_i = 0,782$. Hodnota koeficientu nerovnovážné interakce pak byla nastavována ručně dokud porovnávané průběhy už při další změně nevykazovaly ještě větší přiblížení.

V případě vysokého rozdílu ve vodivostech pukliny a okolí, kdy je okolí téměř nevodivé není problém nastavit úlohu s dvojí porozitou tak, aby úloze první odpovídala. V takovém případě se totiž okolí pukliny výrazněji nezapojuje a úlohy jsou tedy téměř totožné (viz obr. 17).



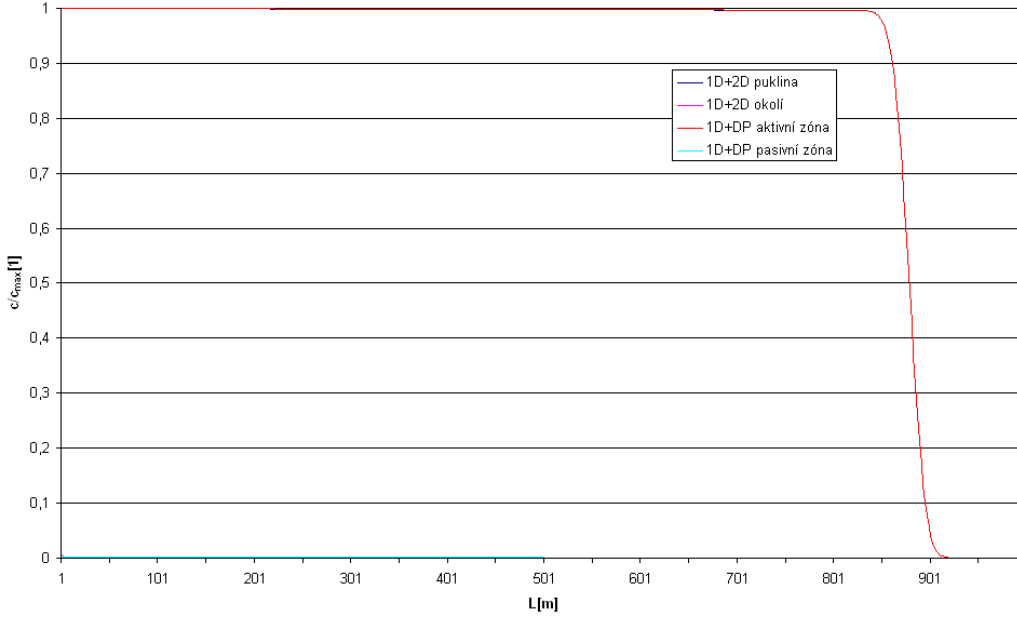
Obrázek 17: Úloha s vysokým poměrem vodivostí ($K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^8$). Puklina neinteraguje s okolím.

Na obrázku je vidět rozložení koncentrace látky v puklině na obou úlohách. Koncentrace v okolí, resp. v imobilní zóně je velice malá. Křivky z obou úloh splývají.

Úloha s takto velkým poměrem hydraulických vodivostí není dostatečně reprezentativní, protože pro daný poměr vodivostí nedochází i při větší změně koeficientu nerovnovážné interakce k velké změně průběhu křivek.

Více vypovídající jsou testy s poměry nižšími, viz tabulka 3. Rovněž v případě menších rozdílů vodivostí bylo třeba úlohu s dvojí porozitou vhodně kalibrovat, aby odpovídala úloze s okolím. To se dařilo až do oblastí, kdy se poměr vodivostí

blížil řádu 10^3 . V prozkoumané oblasti poměru vodivostí $10^8 - 10^3$ se podařilo nalézt takové parametry dvojí porozity, aby si úlohy přibližně odpovídaly. To je patrné například z obrázků 18, 19 a 20.



Obrázek 18: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^5$.

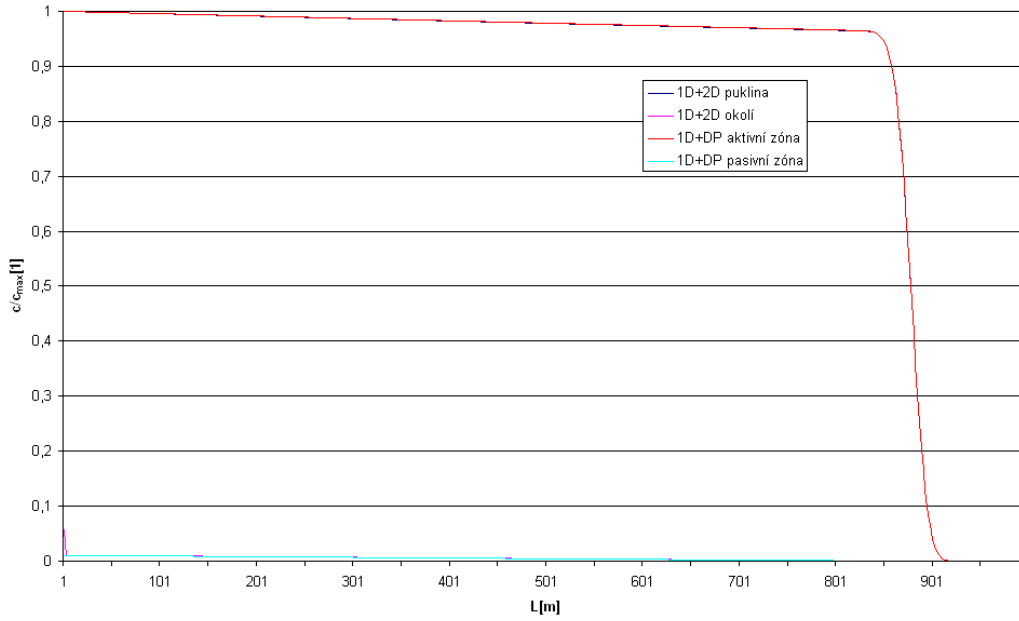
K^{1D}	K^{2D}	K^{1D}/K^{2D}	α
10	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^5$	$8,250 \cdot 10^{-7}$
10	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^4$	$8,250 \cdot 10^{-6}$
10	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^3$	$8,250 \cdot 10^{-5}$

Tabulka 3: Parametry úlohy s menšími poměry hydraulických vodivostí.

Byly tedy nalezeny hodnoty koeficientu nerovnovážné interakce i pro další poměry hydraulických vodivostí. S o řád klesajícím poměrem vodivostí koeficient α stoupal také vždy o řád. Průběhy koncentrace si byly stále velmi blízké.

Hodnoty porozity mobilní a imobilní zóny zůstávají konstantní. Požadovaný průběh koncentrace v úloze s dvojí porozitou se tedy nastavuje pouze hodnotou koeficientu nerovnovážné interakce.

Na základě získaných hodnot se podařilo nalézt přibližný experimentální vztah,



Obrázek 19: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^4$.

který na základě známých hydraulických vodivostí dává potřebnou hodnotu koeficientu nerovnovážné interakce při neměnících se porositách.

$$\alpha = \frac{coef \cdot K^{2D}}{K^{1D}}, \quad (10)$$

kde K^{1D} je hydraulická vodivost puklin,
 K^{2D} hydraulická vodivost okolí,
 $coef.$ koeficient závislý na konkrétní geometrii úlohy.

Koeficient je sice závislý na konkrétní geometrii úlohy, ale pro danou geometrii je už konstantní. Po jeho nalezení pro jeden typ ostatních parametrů už platí v dané úloze pro libovolné parametry ze zmiňované oblasti poměrů vodivostí.

Ze vztahu 10 byly dopočítány některé další parametry a výpočtem úlohy byla ověřena platnost vztahu v rozsahu poměru vodivostí $10^5 - 10^3$. Následuje tabulka 4 s hodnotami parametrů.

Pro menší poměr koeficientů hydraulické vodivosti výše uvedený vztah přestává platit. Až do poměru 10^2 však lze nalézt takové parametry, aby se model s dvojitou porozitou přiblížil modelu s okolím.

K^{1D}	K^{2D}	K^{1D}/K^{2D}	α
10	$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^4$	$4,125 \cdot 10^{-6}$
10	$5 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^3$	$4,125 \cdot 10^{-5}$

Tabulka 4: *Parametry úlohy, získané výpočtem ze vztahu 10*

Pro poměry menší než 10^2 už nelze dosáhnout požadovaných průběhů pouhou změnou koeficientu nerovnovážné interakce ani úpravou hodnot mobilní a imobilní porozity.

V tabulce 5 jsou parametry, které vycházejí ze vztahu 10. Výsledky úloh s těmito parametry se však už dostatečně neblíží požadovanému průběhu, jak je vidět na obrázcích 21, 22 a níže na 25 a 27

K^{1D}	K^{2D}	K^{1D}/K^{2D}	α
10	$5 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^2$	$4,125 \cdot 10^{-4}$
10	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^2$	$8,250 \cdot 10^{-4}$
10	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^1$	$8,250 \cdot 10^{-3}$
10	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^0$	$8,250 \cdot 10^{-2}$

Tabulka 5: *Tabulka koeficientů hydraulických vodivostí a jim odpovídajících koeficientů nerovnovážné interakce, vypočtených ze vztahu 10.*

Tabulka 6 obsahuje upravené koeficienty α pro stejné poměry hydraulických vodivostí.

K^{1D}	K^{2D}	K^{1D}/K^{2D}	α
10	$5 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^2$	$3,75 \cdot 10^{-4}$
10	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^2$	$7,00 \cdot 10^{-4}$
10	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^1$	$4,00 \cdot 10^{-3}$

Tabulka 6: *Tabulka hodnot kalibrovaných na úlohách s malým poměrem hydraulických vodivostí, kde už neplatí vztah používaný pro poměry vyšší.*

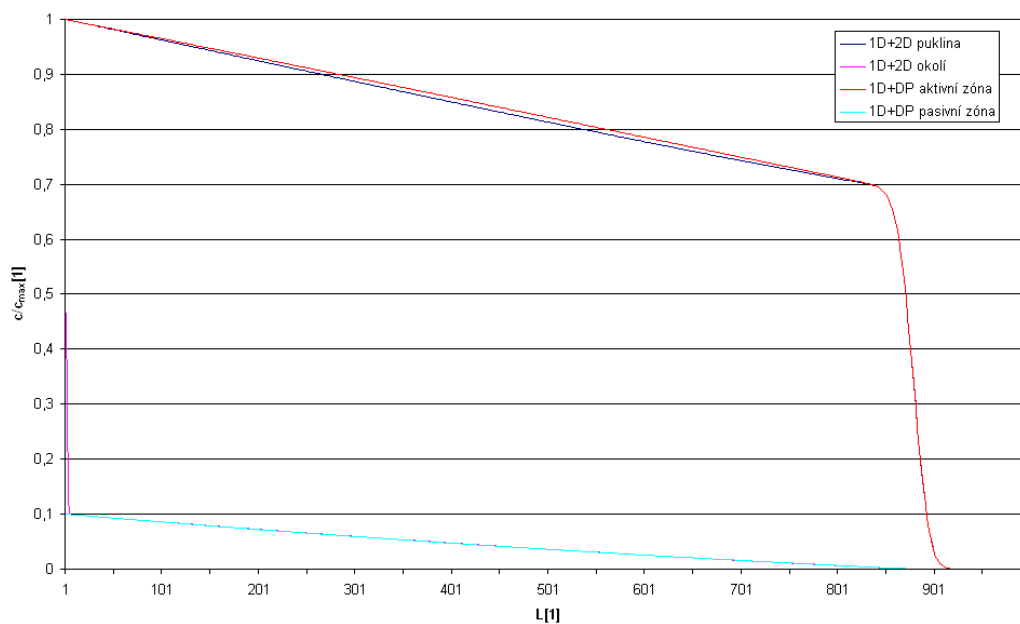
Průběhy modelů s dvojí porozitou odpovídající poměrům vodivostí $2 \cdot 10^2$ a $1 \cdot 10^2$ viz obr. 23 a 24 se blíží průběhům vypočteným na úloze pukliny s okolím.

Pro případ poměrů $1 \cdot 10^1$ a $1 \cdot 10^0$ se nepodařilo nalézt odpovídající hodnoty koeficientu α , aby se výsledné křivky sobě blížily. V případě obou poměrů však byly nalezeny průběhy, které svým tvarem požadované křivce odpovídají, jsou ale na ose x posunuty jině, jak je vidět z obrázků 26 a 27.

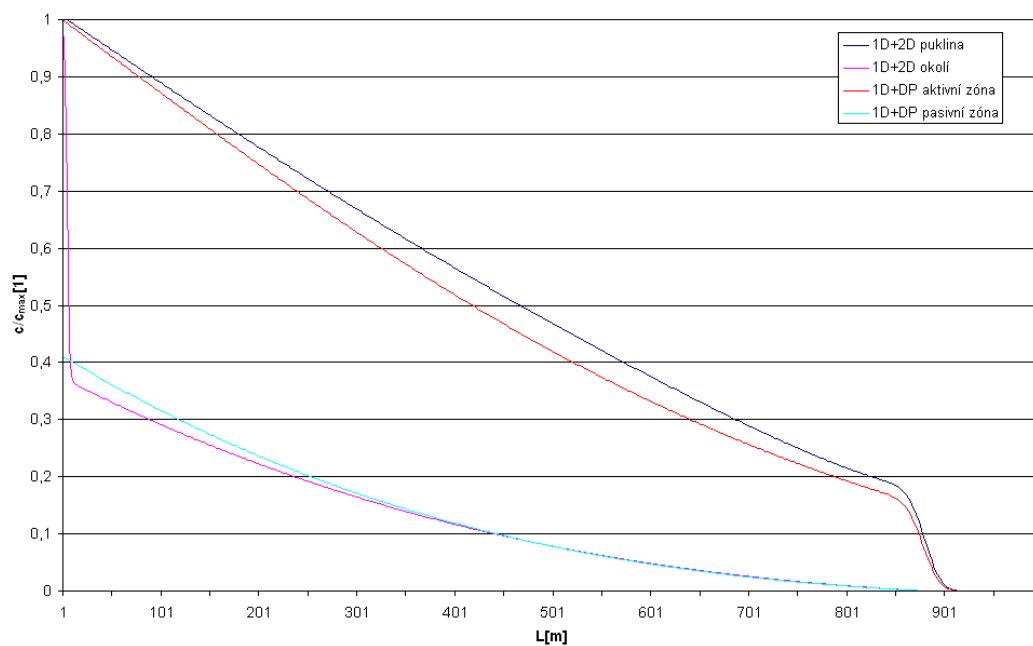
Poměr hydraulických vodivostí 10^1 a 10^0 se v reálném puklinovém prostředí nemůže vyskytovat. Tyto případy jsou uvedeny pouze pro ukázkou chování modelů při zadání takto extrémních parametrů.

Vztahy jednotlivých parametrů byly v krátkosti porovnány na širší úloze (viz sekce 5.2). Hodnoty porozit byly upraveny tak, aby odpovídaly poměru objemů pukliny a jejího okolí, tak jako tomu bylo v základní testované úloze. Kalibrací modelu s dvojí porozitou jsme dostali pro různé poměry hydraulických vodivostí odpovídající koeficienty nerovnovážné interakce. Jejich hodnoty byly kvantitativně jiné, nežli v úloze základní, ale zákonitosti, které se podařilo v základní úloze nalézt, platily pro rozšířenou oblast také.

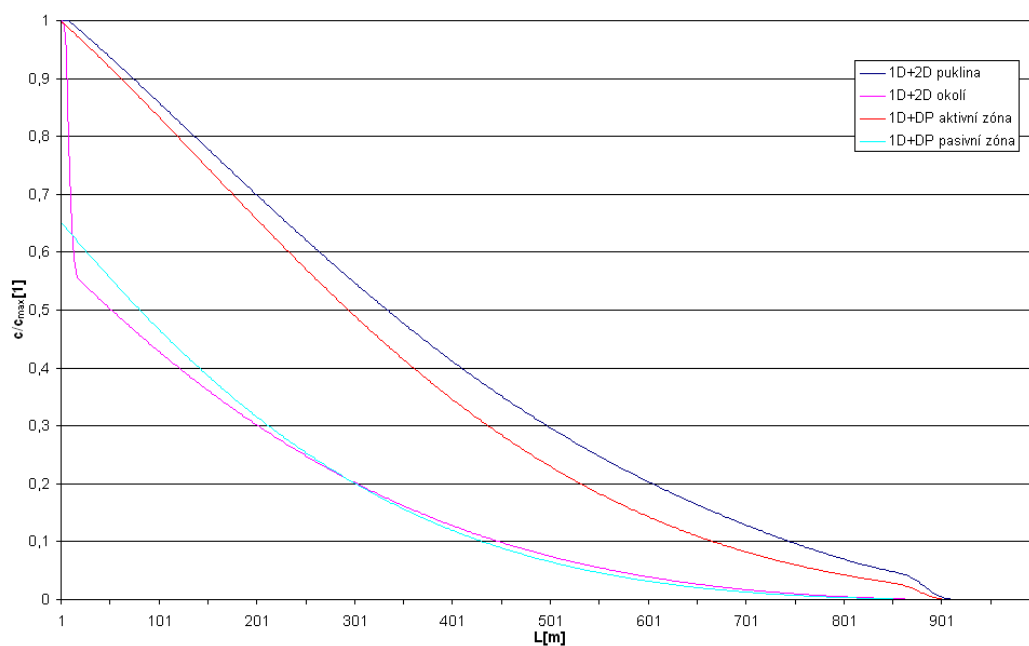
Z výsledků lze tedy usuzovat, že hodnoty parametrů, konkrétně koeficientu ve vztahu 10, jsou dány geometrií úlohy.



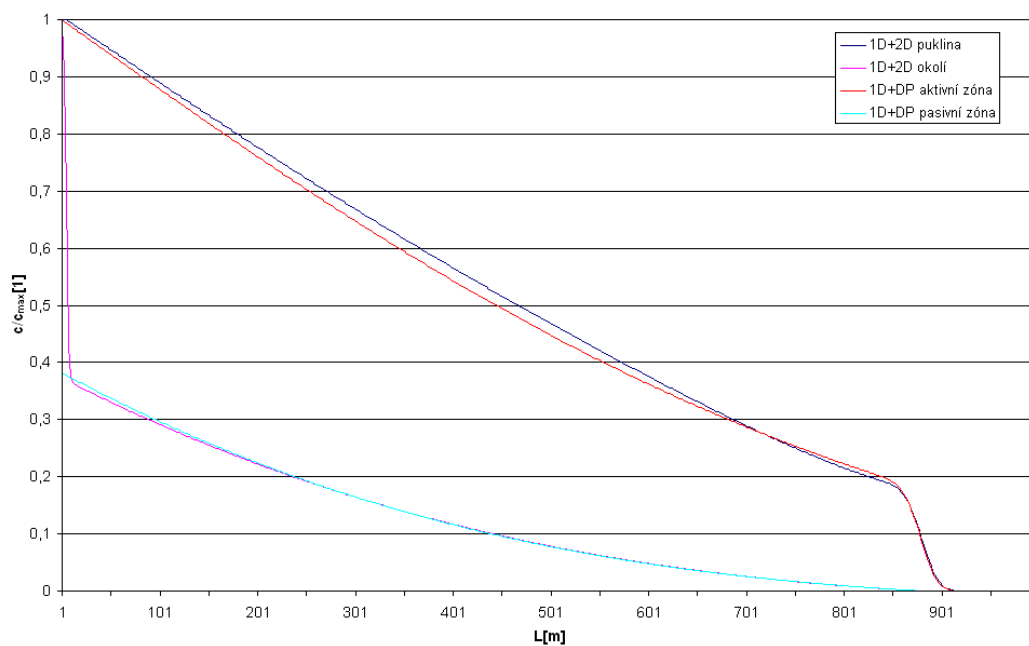
Obrázek 20: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^3$.



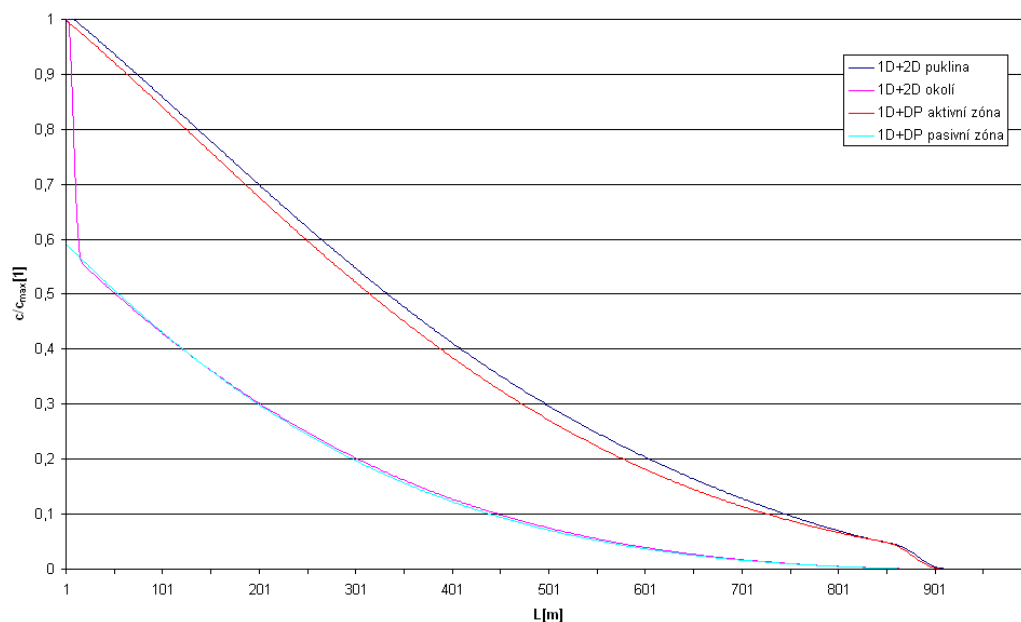
Obrázek 21: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 2 \cdot 10^2$. Pro úlohu s dvojí porozitou volen vypočtený koeficient α .



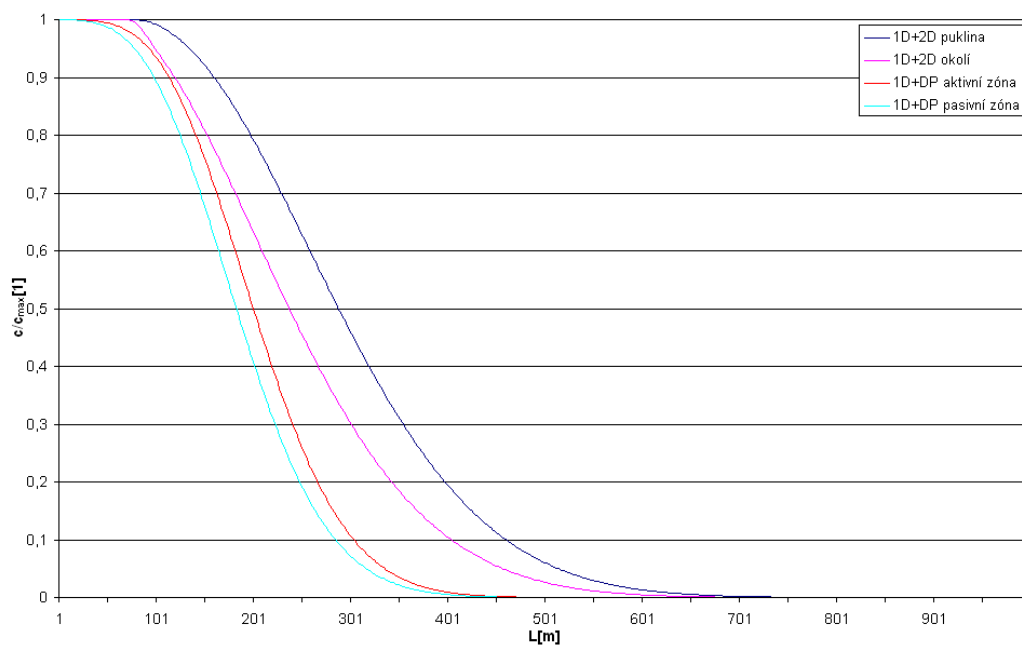
Obrázek 22: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^2$. Pro úlohu s dvojí porozitou volen vypočtený koeficient α .



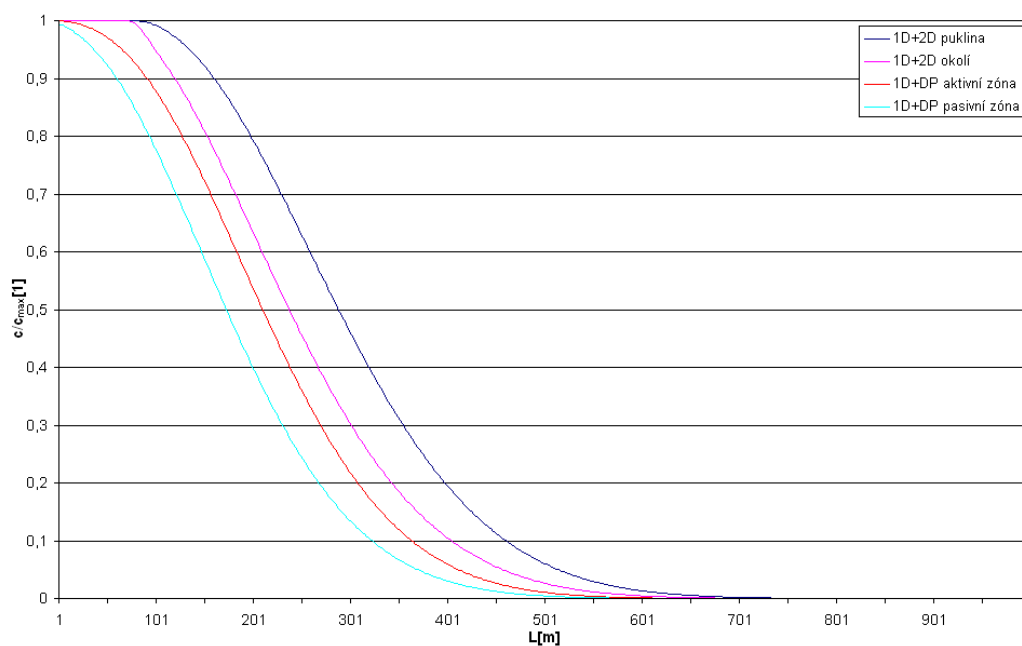
Obrázek 23: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 2 \cdot 10^2$. Koeficient α upraven proti hodnotě vypočtené podle vztahu 10.



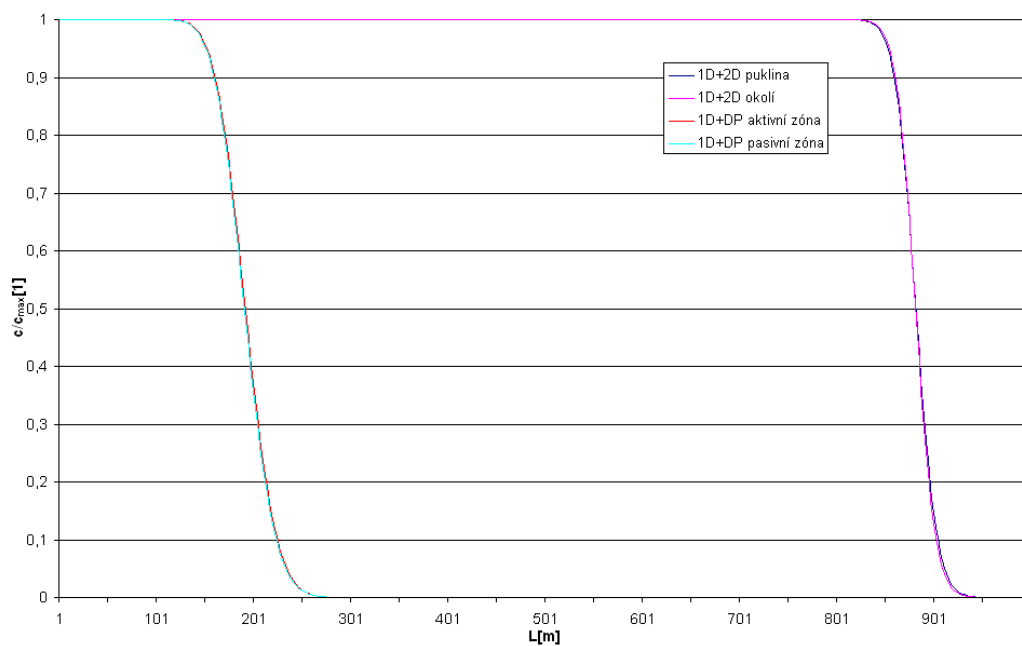
Obrázek 24: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^2$. Koefficient α upraven proti hodnotě vypočtené podle vztahu 10.



Obrázek 25: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^1$. Pro úlohu s dvojí porozitou volen vypočtený koefficient α .



Obrázek 26: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^1$. Koefficient α upraven proti hodnotě vypočtené podle vztahu 10.



Obrázek 27: Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^0$. Pro úlohu s dvojí porozitou volen vypočtený koefficient α .

7 Závěr

Stávající program, počítající proudění a konvektivní složku transportu, byl rozšířen o výpočet dvojí porozity. Tento proces byl přiřazen do výpočetního cyklu metodou rozkladu operátoru.

Jeho začlenění do programu znamenalo upravit vstupní a výstupní struktury programu. Výstup je organizován obdobně jako u původního výpočtu samostatné konvekce, nyní mobilní zóny. Vstupy jsou pro potřeby testů ve zjednodušené formě, ale snadno upravitelné podle požadavků pracoviště.

Za účelem přehlednějšího vyhodnocování výsledků na testovaných úlohách byl do programu začleněn výpočet řezu oblastí. Pro potřeby této funkce byly přidány další vstupy a výstupy.

Byla zvolena demonstrační 2D úloha s jednou dominantní puklinou, na níž byly testovány porovnáváné aproximace. V prvním případě bylo okolí pukliny aproximováno 2D elementy porézního prostředí a ve druhém případě imobilní zónou dvojí porozity.

Kalibrací vstupních parametrů pro aproximaci s dvojí porozitou byly nalezeny průběhy koncentrace, blízké výsledkům aproximace s okolím nahrazeným porézním prostředím. Na základě těchto výsledků byl sestaven přibližný vztah, pomocí něhož byly extrapolovány parametry dvojí porozity pro další vzájemné poměry hydraulických vodivostí. Výsledné průběhy, vypočtené na základě těchto parametrů, byly rovněž blízké průběhům, vypočteným na úloze aproximované porézním prostředím. Mezi oběma aproximacemi byla tedy nalezena souvislost pro jejich vstupní parametry, ležící mezi okrajovými nereprezentativními hodnotami.

Pro malé poměry mezi hydraulickými vodivostmi pukliny a okolí už chybí fyzikální interpretovatelnost výsledků. Takto blízké hydraulické vodivosti pukliny a jejího okolí v praxi nemohou existovat. Na druhé straně pro vysoké poměry už nedochází téměř k žádnému šíření transportované látky do okolí pukliny a okolí tedy na transport v puklině nemá vliv.

Dalším pokračováním v tématu by mohlo být vytvoření programu pro automatické testování shody vypočtených charakteristik a s tím související kalibrace parametrů. Touto metodou pak provést testy na dalších typech geometrií. Z většího souboru výsledků pak nalézt přesnější závislosti mezi oběma reprezentacemi a rozšířit tak možnosti jejich společného využití.

Reference

- [1] J. Maryška, O. Severýn, M. Tauchman and D. Tondr: Modelling of the groundwater flow in fractured rock - a new approach, *Proceedings of Algoritmy 2005*, 113-122.
- [2] Ph. Renard, G. de Marsily: Calculating equivalent permeability: a review, *Advances in Water Resources*, 20, 253-278 (1997).
- [3] I. I. Bogdanov, V. V. Mourzenko, J.-F. Thovert: Effective permeability of fractured porous media in steady state flow, *Water. Res. Research*, 39, 2003.
- [4] J. Bear, Y. Bachmat: Introduction to modelling of transport phenomena in porous media, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1991, ISBN 0-7923-0557-4.
- [5] C. Gallo and C. Paniconi and G. Gambolati: Comparison of solution approaches for the two-domain model of nonequilibrium transport in porous media, *Adv. Water Resour.* 19 (1996), 241–253.
- [6] M. Hokr: Transportní procesy, učební text, Technická univerzita v Liberci, 2005.
- [7] J. Bear and V. Verruijt, Modeling groundwater flow and pollution, D. Reidel, Dordrecht, Holland, 1990.
- [8] M. Hokr: Model of Flow and Solute Transport in Dual-porosity Media, *Díseřtační práce*, Technická univerzita v Liberci, 2003.
- [9] O. Severýn: Model proudění a transportu látek v puklinovém prostředí, *Díseřtační práce*, Technická univerzita v Liberci, 2002.
- [10] J. Maryška, O. Severýn, M. Vohralík: Numerical simulation of fracture flow with a mixed-hybrid FEM stochastic discrete fracture network model, *Computational Geosciences* 8: 217–234, 2004.
- [11] V. Beneš: Hydrodynamika transportních a transformačních procesů polutantu v podzemních vodách, Academia Praha, 1995.
- [12] C. Zheng and G.D. Bennett: Applied contaminant transport modeling, Van Nostrand Reinhold, New York, 1995.

Seznam tabulek

1	<i>Tabulka hydraulických vodivostí, použitých při výpočtech na úloze s okolím aproximovaným porézním prostředím. K^{1D} je vodivost pukliny a K^{2D} vodivost okolí.</i>	32
2	<i>Tabulka nastavitelných parametrů dvou porovnávaných aproximací.</i>	32
3	<i>Parametry úlohy s menšími poměry hydraulických vodivostí.</i>	34
4	<i>Parametry úlohy, získané výpočtem ze vztahu 10</i>	36
5	<i>Tabulka koeficientů hydraulických vodivostí a jim odpovídajících koeficientů nerovnovážné interakce, vypočtených ze vztahu 10.</i>	36
6	<i>Tabulka hodnot kalibrovaných na úlohách s malým poměrem hydraulických vodivostí, kde už neplatí vztah používaný pro poměry vyšší.</i>	36

Seznam obrázků

1	<i>Puklinová struktura na vzorku horniny. Struktura puklin je znázorněna obarveným roztokem. Patrné jsou průtočné a slepé pukliny.</i>	8
2	<i>Příklad horniny s patrnou dominantní puklinou a z ní vybíhajícími strukturami.</i>	10
3	<i>Hornina se dvěma významnými puklinami a systémem na ně navazujících drobných puklin.</i>	11
4	<i>Dvojí kontinuum.</i>	13
5	<i>Řez 3D puklinovým prostředím. Puklina je reprezentována 2D elementy a její okolí elementy 3D.</i>	14
6	<i>Řez 3D oblastí s jedinou dominantní puklinou. Puklina reprezentována 2D elementy a okolí imobilní zónou.</i>	15
7	<i>Ukázka pole rychlostí na jednoduché oblasti s puklinou, vypočtených smíšenou hybridní formulací MEP.</i>	23
8	<i>Ukázka rozložení tlaků, vypočtených smíšenou hybridní formulací MEP.</i>	24
9	<i>Čelo koncentrace šířící se puklinou (výřez délky 50 z oblasti délky 1000). Okolí pukliny tvoří 2D elementy, do kterých se látka téměř nešíří.</i>	24
10	<i>Transport látky 1D puklinou s dvojí porozitou (výřez délky 50 z oblasti délky 1000).</i>	25

11	<i>Koncentrace v puklině na 2D úloze.</i>	26
12	<i>Koncentrace v mobilní a imobilní zóně na 1D úloze.</i>	27
13	<i>Rozměry elementů</i>	28
14	<i>Úloha s dominantní puklinou, aproximovanou 1D elementy a jejím horninovým okolím nahrazeným 2D elementy.</i>	29
15	<i>Úloha s 1D puklinou a jejím okolím, nahrazeným více 2D elementy.</i>	30
16	<i>Úloha s dominantní puklinou aproximovanou 1D elementy. Okolí pukliny je reprezentováno imobilní zónou. Informace o koncentra- cích v ní je nesena elementy dominantní pukliny.</i>	31
17	<i>Úloha s vysokým poměrem vodivosti ($K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^8$). Puklina neinteraguje s okolím.</i>	33
18	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodi- vostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^5$.</i>	34
19	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodi- vostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^4$.</i>	35
20	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodi- vostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^3$.</i>	38
21	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodi- vostí $K^{1D}/K^{2D} = 2 \cdot 10^2$. Pro úlohu s dvojitou porozitou volen vypočtený koeficient α.</i>	38
22	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodi- vostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^2$. Pro úlohu s dvojitou porozitou volen vypočtený koeficient α.</i>	39
23	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vo- divostí $K^{1D}/K^{2D} = 2 \cdot 10^2$. Koeficient α upraven proti hodnotě vypočtené podle vztahu 10.</i>	39
24	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vo- divostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^2$. Koeficient α upraven proti hodnotě vypočtené podle vztahu 10.</i>	40
25	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodi- vostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^1$. Pro úlohu s dvojitou porozitou volen vypočtený koeficient α.</i>	40
26	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vo- divostí $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^1$. Koeficient α upraven proti hodnotě vypočtené podle vztahu 10.</i>	41

27	<i>Rozložení koncentrace látky v puklině. Poměr hydraulických vodivosti $K^{1D}/K^{2D} = 1 \cdot 10^0$. Pro úlohu s dvojitou porozitou volen vypočtený koeficient α.</i>	41
----	---	----

Seznam příloh

Přiložené CD obsahuje:

- *Elektronická verze této zprávy* Diplomová práce.pdf
- *Spustitelný soubor a zdrojové kódy upravených modulů*
- *Geometrie základních testovaných úloh*